

数値計算と計算機の歴史

NEC 第三事業本部

曾谷勝義

1. はじめに

数値計算と計算機の発達の関係に於いて、その関わりを歴史的観点から論じる。数値計算は古来人類が生活に必要とされるものに始まり、ルネッサンス以降は科学技術を支える手段として発展して来た。計算機はそのルーツを辿れば測量器具にあると考えられる。数値計算の発達とこれらに応える形で測量や計算機が必要とされ、それは測定器から簡易式機械計算機へ、やがて機械計算機から電気計算機へ、そして電子計算機へと発達して来た。こうした内容を歴史的に見た関係を紹介したい。

2. 概論

電子計算機ENIAC(1946)が世に登場して以来、早や半世紀以上が経過した。この間に国内外の多くのメーカーがコンピュータと名付けて商品化している。本稿では過去の文献を調査しながら、数値計算と計算機の関連に焦点に充てたい。

ここで計算機の発達の歴史を簡単に振り返ってみる。何処までを計算機と言うか、つまり計算機の定義の仕方にもよるが、これを計算器具として定義するならば、そのルーツは古く、紀元前に遡る事が出来る。紀元前 300年頃、古代ギリシャの惑星儀と見られる青銅の破片に、太陽の黄径と時差を見いだす為の計算と計測装置に関する記述が考古学の観点から見受けられるという。更に数千年遡った古代エジプトでは土地や

建造物の測量、古代天文学の必要性等から測量や計算が始まったと考える事が出来る。例えばピラミッドを造る時、計算を目的とするある種の測定器が使われたのではないかと考古学上推測されている。更に太古の先史文明を研究すると、日時計や太陽周期に関連するもので、測定器を用いたのであろうと推測される石造物が幾つか見つかっている。

こうして歴史上、紀元前から測定器(計算器)として確認されるものが幾つもあると考えられている。そうした中で計算機の必要性として古資料に残っている物からは、既に15世紀初頭には、その後の機械計算機の考えの原点となっているアルカシ(al-Kashi)の簡易算定器[天文学計算の必要性]が考案されている。今日現存しているものとして数百年前の計算機として残っていた設計図から復元されたものに17世紀初め簡易機械仕掛けの手動回転式計算機(シカト(Sikart),1623)で、加減乗除算が計算出来る物があり、天文学〔ヨハ・ケプラーの時代 (Kepler, Johannes, 1571~1630 ドイツ)〕のころがあったと記されている。17世紀、18世紀、19世紀、20世紀、21世紀と時代が進むにつれて計算機も進歩し、大きな計算が出来る様になった。

こうして初期には測量の計算から計算可能な測定器の装置へ、そして回転式機械方式から配線盤形式のパンチカード機械方式へと発達し、更にプログラム内蔵形式へと、そのプログラムも機械語から後に高級言語へと技術が発達して来た。これを計算機の構成要素から考えると、簡易式測定器具から計算器具へ、そして手動

による回転式機械から、機械仕掛けの歯車へ、次に電氣を利用した電氣計算機としてのモーター動力機から配線盤へ、更に素子の時代になり、真空管、トランジスタ、IC、LSI、VLSIへ発達して行く。一般的には真空管以降のものを電子計算機、今日では略称コンピュータと呼称している。

以上より歴史的に見ると、これらを計算機として大分類するならば、簡易測定器、測定器、測定計算器、簡易機械計算機、機械計算機、電氣計算機、電子計算機の順に発達してきた。つまり計算機は人類の文明社会の進歩と共に発達してきたと考える事が出来る。

一方、数値計算は近年に於いては理工学に於ける理論的な近似解を得る手段として研究されて来たが、この数値計算も既に紀元前数千年前から考え出されて発達してきており、まさに計算機の発達と共に進歩したと定義づける事が出来る。

この数値計算を古代から中世にかけて数字・数式の観点から考えると、ヨーロッパ圏、アラビア圏、インド圏、中国圏と幾つも分かれて、数式と計算方式が独自に発達して行く時代があった。やがて8世紀の天才数学者 al-Khowarizmiの代数学書(アル・ブ・アル・ホルズミの語源となる)が、後年ヨーロッパに持ち込まれて開花する。このal-Khowarizmiの代数学を起源として、その後数百年を経て19世紀末には、アラビア数字とその記号が世界中に普及する。そして20世紀に入ると、世界中の人々がアラビア数字を共通して使う時代になる。この共通数字の表現により、国によっては言語や数字の発音は違っても、数字の意味する所は同じであり、その数字数式を見るだけで、お互いに意味が分かる事が出来た。つまり、数字の表現の変換を行う必要が無く、同じ共通の表意文字(数字・数式)で世界中の人々が考える事が出来、科学技術文明が急速に発達する時代となった。

3. 数値計算の原点

数値計算のルーツを辿ってみると、方程式の計算方法は既に紀元前数千年前から研究されてきた(パピルス数学辞典BC2500)様である。古代エジプト時代に於いては紀元前のアルキメデス(Archimedes of Syracuse, BC287 ~ 212)の研究書(BC225)に平方根を求める方法が分かっていたとされている。この他、歴史上著名な人物は多く存在している。計算機を使つての計算研究は、既に17世紀初頭からいろいろと行われてきた様である。

近年の大規模計算に必要とされる行列に対する考えの起源を辿ると、ニュートン(Newton, Sir, Issac, 1642 ~ 1727 年)の方程式を複数個並べて考えたライプニッツ(Leibniz, Gottfried, 1646 ~ 1716 年)の行列式表現「行列式の原案の考察(1690)」に始まる。ライ

プニッツの行列式表現は連立一次方程式のルーツである。後の時代、解析学に著名な業績を残したラグランジュ(Lagrange, Joseph, Louis, 1736 ~ 1813 年)は、ライプニッツの行列式を研究し、「行列式の表現(1773)」を発表している。数学者コーシー(Cauchy, Augustin, Louis, 1789 ~ 1867 年)は、ラグランジュ研究に始まり、行列の和、差、積、除(逆)を論じ、行列体系(「行列式」(1812)の論文発表)を確立させた。コーシーと同時代のガウス(カル・フリードリッヒ・ガウス, Carl Friedrich Gauss, 1777 ~ 1855 年)は数値計算としての方法論の考えを独立させた。そしてガウスの消去法(Gaussian elimination method)と呼ばれる大革命的な数値解法を提案した(1823)。これはその後の行列におけるあらゆる数値計算の原点となっている。この「ガウスの消去法」に行列の数値解法におけるその源流を見いだす事が出来る。これは現在においても数値計算として、教育にも研究にも産業界にも広く使われている解法である。消去法と言う考え方の簡便性と、その数値上の厳密性は現在に至っても他に例をみない。

このガウスの消去法以前の計算手法は、形式計算術(Logistica Speciosa)とか、数値計算術(Logistica Numerosa)と呼ばれたもので、簡易式差分的近似式計算、手計算同形式での四則演算、微積分への簡易式近似計算、更に対数による簡易計算等の考えのものであった。これらの方法は、現在の各種差分式計算のルーツとなっているものである。この時期以降の計算に対する考えの大きな流れは以下の様なものであった。18世紀から19世紀初めの計算方法の考え方は、経験主義による力学に基礎をおく物理的法則に大きく依存するものであった。それらは古典数学としての強存在(解析的思考)としての数値計算の確立であった。

ガウスの消去法に代表される直接法としての解法はまさにこの流れを引いていると考える事が出来る。この伝統的解析方法の進展に対して、その後批判的精神による解析方法の基礎的吟味により、ある転換期があった。もともと別な出発点から流れてきたものであるが、それは純粋に数概念の上に解析方法を構成する考えが一方で発達してきた。又、その時期迄に考えられていた「無限小」の概念が確立した形をとり、連続的反复事象が極限迄続くと言う考えが出された。この代表的なものがヤコビ(Jacobi, C.J., 1804 ~ 1851 年)の反復法である。19世紀後半になると、それ迄の機械論的、唯物論的数学から理論的展開による理論数学と、一方、工学分野に解を求める応用数学としての発展があった。これらの数学の発展がその後の数値計算を大きく発達させていった。20世紀に入って観念的精神によって発達してきた考えは、やがて社会の発展と共に、近代数学から現代数学への橋渡しとして方向性をもたらした弱存在(抽象的存在の考え方)の展開へと推移して行く。これは例えば、CG法にみる一次独立

なベクトルを定義し、n次元空間内を探索する考え方である。これらの考え方の進展が、その後の多くの直接法の高速度化、合わせて多くの改良型反復法のアルゴリズムを発掘させる事になる。

4 . 数値計算と計算機の発達

数値解析とその技術的ニーズの関連、及び計算機発達の歴史を対応させて、一つの区切り毎に簡素にまとめてみたい。古代、中世、近世等は科学史上の分類基準とする。

1) (紀元前、古代) 紀元前超古代からギリシャ繁栄の時代迄

考古学、人類学の研究からは、人類は約3万年前位から10進数(人間の両指の数)が使われていた事が分かっている。

[注：それ以前は5進数(片手の指の数、100万年前位)である事が分かっている。]

最近の研究では1万年以上前と考えられているイギリスのストーン・ヘンジ、更に先史時代、超太古の遺跡と考えられるオルメク文明あたりは、1万数千年前から数万年前に作られた日時計や太陽周期に関連する石造物が幾つか残されている。これらには何らかの測定器を用いて計測しなければ作れないものであろうと考えられる。

やがて文明の創世紀に入り、古代エジプト(BC5000 ~)では、計算へのあけぼのを迎える。四則演算から、やがて分数の表現まで発達して行く。この時代には、既に太陽の運行から計測器を用いてエジプト暦法が定められた記録が見つかっている。巨大な建造物、特にピラミッド建設時、測定器を用いて、土地と建造物の測量をして、幾何学から求めた計算を数値計算として実施していたことが確認されている。特筆すべき点として、古代エジプトの天才数学者アハメス(Ahmes BC2000 ~ ?)は、二等分法をはじめ、三角法、分数乗除算、建物表面積の計算法、円周率の考え方や最小公倍数の考え方、および連立方程式の考え方迄まとめていた記録が見つかっている。

古代メソポタミア(BC4000 ~)では、天体測定器を用いて太陽の周期を計算し、太陽はおよそ360日で同じ位置に戻ると計測された。今日、円の一周が360°(度)である由縁はここから来ている。この時期、これまでの10進数に対して、更に天体の観測に合わせて新しい数学の考え方として、12進数、60進数等が用いられる様になる。(この12進数は両手の指の数に両腕の数を加えて基本数とした。その12に人間の5体を掛けて、60進数と定義した。)

今日の12ヶ月、12時間、60分、60秒の考え方の始まりである。これは古代メソポタミアで起きた占星術(12の星座)の

考えにも関係している。

[注：古代東洋においても10干12支の組み合わせによる60進数の考えが独立して起きた。]

バビロニアの時代(BC3000 ~)になると数学研究が盛んに行われた。バビロニア数学(BC2500)においては、2次方程式の解法、ベキ乗法、近似円面積、近似円周等の円に関する近似解が計算されルート()表現等も現れている。更に新しい考え方として、2進数表現と具体的な計算方法が示されている。この時代、数学、数値計算に関する事が、一部の人達で研究されていた様である。あわせて幾何学への発達も見られた。それらに関するかなりの遺物(粘土板他)が、各地域から幾つも発見されている。

繁栄の中心がギリシャ時代(BC900 ~ AD400頃)に入ると、古代オリンピック競技の開催(BC776 ~ AD393、ヘラクレスが始めたオリンピックの土地での蹴球競技、4年毎に開催、第293回大会迄)も合わせて、国は大いに繁栄し、歴史上有名になるが、その中でも特にBC600年頃 ~ AD300年頃に数学が最も研究された。このギリシャ時代には、二つの学派(ピタゴラス派、ピタゴラス派)により、数学は大きく進展して行く。アッポロニウス(Appollonius of Perga)、ヘロン(Heron of Alexandria)、プトレマイオス(Ptolemy of Alexandria)等による平方根を求める解法、円周率、三角関数、極大、極小、接線、法線、指数計算、極座標、放物線の求積、球面三角法等を始め、流体静力学もあり幾つもの数値計算が実施されて来た。多くは幾何学として実用面からの研究であった。理論数学者ユークリッド(Euclid of Alexandria, BC350 ~ ?)は、数学原論(BC300)を出し、数学理論を確立させた。これは今日の数学の基礎理論となるものである。同時にこの時代には、天文学の計測装置(BC300)も使用された様である。遺跡からは計算の出来る計測装置等が発見されており、この装置は今日の計算機の源流として見い出されるものである。ギリシャ時代も西暦の時代になってからは、ユークリッドの球面幾何学(98)、ユークリッドの算術入門書(100)、ディオファントスの代数学書(250)、パプスの数学集成(300)等が残されている。

数学と計算機発達の面から、古代では数学の基礎となるべき計算と、実用的な幾何学、更に天体観測と、その計算をさせるべき測定器が使われていたと、考古学の点から考えられる。

2) (476 ~ 1453) 中世

東ローマ帝国の滅亡からルネサンス迄のおよそ1千年間を歴史学者は中世と定義づけている。この中世の時代、数学の面でイスラム教の思想とキリスト教中世思想による算術と初等幾何学が結び付けられ、宗教と科学(数学)が相互に助け合う考え方になっている。

中世の時代は、全般として算術は商取り引きがテーマ

になっている。中でも「算術の書」はインド数学とアラビア数学が混在していたものであり、商取り引きの問題で通貨交換の計算で複雑な分数式を用いられる様になった。ここでは根の開法迄示されている。

数学書の面からみると、現在残されている古文書として、ポトウスの算術入門書(525)、及び幾何学書(525)(インド)、アリア・バタの数学書(530)(インド)、プラガータの数学書(628)(インド)、そして最も著名なものに天才数学者アル・コリスミが残した代数学書(780)(アラビア)等が残されている。この中世の時代もギリシャ数学であるタレス、ピタゴラス、アリストテレス、アレキサンダー等古代数学の研究を中心に一部の人達が研究していた。

13世紀初め 当時ヨーロッパ最高の数学者 フィボナッチ(Fibonacci, Leonard, 1175 ~ 1225 イタリア)は、アラビア商人から手渡されたアル・コリスミ(アルゴリズム)の代数学書(780)を研究して、そのすばらしさに驚嘆感銘し、それまでのヨーロッパ世界を占めていたローマ数字ではなく、これからの数学にはアラビア数字を使用して記述すべきであると考え、各国各地でアラビア数字の啓蒙と普及を努めた。

[注：アラビア数字はヨーロッパで普及のあと、その後ルネッサンスから後の時代に、数百年をかけてやがて全世界に広がった。アル・コリスミは数字だけで表現できない所に対して、一部ギリシャ文字を使用した所から、その後の物理、化学等の定数にギリシャ文字が使われるようになった。]

フィボナッチ自身の自らの研究課題では「数論」(1225)を取り上げ、ここでは不定問題と確定問題の混在を見分けている。又「平方の書」では2次式の掛け算式の展開、「幾何学の実用書」ではユークリッドからピタゴラスに到る研究を示す等、数々の研究成果を残している。この様なフィボナッチの数学研究と、その普及への努力は、彼の業績を讃えて、その後ヨーロッパの著名な大学(ボローニャ、パリ、オクスフォード、ケンブリッジ等)の創設に繋がった。

[注：この時代の大学ではフィボナッチ数学を勉強した。] このフィボナッチの著名な弟子として活躍した人達は、ワードイン(Wordin, 1190 ~ ? イタリア)、ネレ(Jordanus de Nemore, ? ~ 1237 イタリア)、ニコル・オレム(Orem, Nicole, 1323 ~ 1382 イタリア)、ニコラス(Nicholas of Cusa 1401 ~ 1464 イタリア)等に代表される研究者達であり、彼らは無理数のベキ乗表現や調和級数、級数の和の公理、有理分数の指数表現、無限級数の考え、反比例、逆三角関数の表現、三角法、関数のグラフ表示等も論じた。オレムによる無限級数等の考え方は、現代の行列反復計算の源流になっている。中世末には印刷技術の確立(1447)により、一部の研究者の著作物が、やがて人々の目に触れる様になり学問への普及が進む様になってきた。

この時期、中国(宋時代)では、その後の中国数学を支配した朱世傑によるすぐれた数学書(1230)が今日まで残されている。

計算機発達の面から調査すると、この中世における15世紀初頭には、天文学者(イラク)天文台アルカシ(ed-Din al-Kshi, 1393 ~ 1449 イラク)が天体の運行を計算する必要性を唱えて、その後の計算尺発展へのルーツであり、近代の機械計算機発案の原点となる簡易算定板(1430)を考案し、この計算機器を用いて天文学の計算を行った記録が残っている。

3) (1454 ~ 1600) ルネッサンスから16世紀迄

イタリアを中心として始まったルネッサンスは近代社会に大きな影響力を及ぼした。このルネッサンス興隆の後、科学の中心は再びヨーロッパに戻る。ルネッサンス以降は近代科学の幕開けと共に、文学、芸術、科学(物理、化学、数学)、体育等の興隆があり近代化に向けての研究が行われる様になって来た。特に自然科学においては飛躍の時期であった。数学の発展の点から考えると、ルネッサンスの初期は、イタリアとドイツが発達した。

初期の頃の考え方では、測定しうるものはすべて直線から構成されうると主張されたことから、実用的な考え方に基づく数式を基盤とし、求積法的方法による数学が発達して行く。知識は測定に基礎をおくべきの考え方が主流を占めており、現実的な応用面での研究が中心であった。

この考えからでは、特にイタリアにおいてアルゴリズム(算法)、アルジュラ(代数学)の研究が盛んとなる。幾つものアルゴリズムに関する研究者が出て来た。そして実用的計算を試みる人が出て来た。ダヴィンチ(Da Vinci, Leonardo, 1452 ~ 1519 イタリア)を始めとする近代力学と実用数学、又この時代の代表的研究者としてシピオーネ・ダ・フェロ(Scipione dal Ferro, 1465 ~ 1526 イタリア)に始まる3次方程式の解法の研究はタルタリア(Tartaglia, 1499 ~ 1557 イタリア)を経て、カルダノ(Cardano, 1501 ~ 1576 イタリア)によって完成され、その弟子フェラーリ(Ferrari, 1522 ~ 1565 イタリア)は4次方程式の解法を提唱した。

この時代、等差数列、等比数列等、及びそれに関連する反復計算の考えが出された。その他の著名な数学者として、イタリアのレティクス(Reticus, 1514 ~ 1576)は6種の三角関数、正弦、余弦、正接、余接、余割、正割の数値から三角表を作り、オットー(Otto, 1550 ~ 1605)はレティクスの計算をもとに精細なる三角表(1596)を作った。その他ボンベリ(Bombelli, 1530 ~ ?)虚数の導入、ヴェイタ(Veita, 1540 ~ 1603)解析法入門(1591)、記号代数確立、ステヴィン(Stevin, 1548 ~ 1620)十進小数の提唱(1585)とか、ドイツのレギオモンタヌス(Regiomontanus, 1436 ~ 1476)の三角法(1471)、代数学(1473)、ウィットマン(Widman, 1460 ~ ?)計算学者、記号の明確化等が上げられ、これらの人達が活躍した。

ルネッサンスの中期以降には、多くの式からやがて式だけを中心とした理論的な構築がなされて行く。代表的な

研究者として、フランスのヴィエト(Viete, Francois, 1540 ~ 1603)解析学、現代代数学への序曲とも言うべき代数学研究等が上げられる。

ルネッサンス全体を通しての特徴は、数学と芸術の間に相互関係として発達してきた点として注目に値する。数学上の共通法線から幾何学的模様(曲線群)を描き、3次元空間の移動を平面に投影して透視画法による芸術など多くの関連分野が発達した。これは数学から発達してきたメカニクスの投影図法にみる全地球の表現などにも影響を及ぼした。

16世紀は数学の一分野として統計学(推測学)の考え方が芽生えた時代でもある。この時期は後の計算尺の原理が集約されており、四則計算をはじめ一般算術計算が出来、初期の機械算定器となるガンター(Guntar)簡易算定器(1598)等、幾つかの計算器具がいろいろ研究考案された。

4) (1601 ~ 1700) 17世紀

17世紀に入ると、それ以前に比べて科学技術が飛躍的に進歩し始める時期になる。数式表現、数式活用だけではなく、数値計算で天文学を求めて行こうとする動きになる。木星及びその衛星の観測を行い、これを数値計算したガリレオ(Galilei, Galileo, 1564 ~ 1642 イタリア)は、一方で物体の自由落下等加速度運動、放物線の式、落下と放物運動等の研究を数値計算で求めている。同時期 数理天文学を確立させたケプラーは、この時期研究されてきた対数を用いて天文計算(著名なケプラーの法則)を行い、合わせて関数の極大(小)値研究も行っている。この頃は、幾何学の発達と三角法、円錐線、解析学への本格的芽生えを始め生活に密着した時代であった。従来の数学から一層発展し、理論数学面の基礎となるべき部分が構築し始める時代でも有る。この時期には、一部の人間によるこうした数理研究が行われ、これらの人の計算手法は現在に到る数値計算の源流となる過少近似評価法(今日のホナ法)と言われる方法で、一部は手計算で、一部では機械計算機を使って数値解法として求めている。

この時代の特徴は、数学、数値計算としての専門組織はまだ存在していなかったが、イタリアを始めフランスにおいては少なからず組織化に向けた団体(イングリカルツ)が構成されるようになってきた。ここで情報の交換や技術交流が行われた。数式表現、数式活用が中心であった。こうした情報交換が技術進歩を加速させてきた。哲学者デカルト(Descartes, Rene 1596 ~ 1650フランス)は数学の面でも活躍している。

現存する機械計算機の最古のものが、この時代に作られた。回転機械式のものであり、シカトが開発し、ケプラーが応用を試みたと記録されている。確率論の創始者である数学者パスカル(Pascal, Blaise, 1623 ~ 1662 フラ

ス)も機械計算機(1642)を作り、ここでは彼自身の研究対象である数式計算式の展開から、計算機の実用化を試みた。

バロウ(Barrow, 1630 ~ 1677 イギリス)、ニュートン、ライプニッツの時代になると、数学の中に無限と極限の概念を取り入れた考えが構成される。これらの中から差が無限に小さくなることによる求積法の考えが誕生する。方程式の確立、微分積分の収束計算、差分計算、積分の面積計算等が行われた。これは補間法によって推測した式に始めの増分に対する最初の比を計算するもので、後の時代の収束計算に発展して行くものである。この様に計算を機械で行う為の新しい考えも出される様になる。積分学者ライプニッツも自ら提案した積分計算の検証のため、歯車による機械計算機を考案した(1673)。これらパスカル計算機、ライプニッツ計算機等、この時代の計算機は今日まで残されている。この時代は計算機として四則演算が出来る程度のもので、基本的計算を行っていた。

17世紀後半の特徴は、数学から工学への芽生えの時期であり、運動エネルギーの概念が取り入れられた。音波の等温振動における伝波速度、抵抗媒質中の物体運動、渦巻運動等が数学から発展して行く。こうしたニーズは流率法から進展した解析として、導関数の考え方や、方程式の近似解を求める考えにいたる。この近似解の値のニーズは、計算機の要求として成長して行く。この時代の著名な数学数値計算での活躍者は、ガバリエリ(Cavalieri, 1598 ~ 1647 イタリア)、不可分量の幾何学(1635)、ピエール・フェルマ(Fermat, Pierre de, 1601 ~ 1665 フランス)、一般放物線の求積(1644)、トリッチェリ(Torricelli, 1608 ~ 1647 イタリア)、一般双曲面の求積(1646)等があげられる。数学から流体力学へ発展させたベルヌーイ兄弟(Bernoulli, Jacques 1654 ~ 1705, Bernoulli, Jean 1667 ~ 1748 スイス)等は17世紀から18世紀にかけて活躍し、優れた研究結果を多く残している。

この時期、シカトの計算機に代表される様に、特徴として、従来からの四則計算、一般算術計算を始めとして、回転機械式による方程式計算の数値計算を差分式の計算から求める迄、発展してきた。

5) (1701 ~ 1800) 18世紀

18世紀に入ると更に進歩が見られた。18世紀前半では数値解法の基礎方法論探求の時代である。解析数学が発達し、一方で工学研究に不可欠な偏微分方程式が定義され基礎論が発達した時代である。数理物理学研究者ベルヌーイ(Bernoulli, Jean, 1667 ~ 1748 ドイツ)は流体方程式とその差分形での計算方法を提案した。ベルヌーイの流体力学の考えから発展し、無理数の無限積分として、スターリング(Stirling, James 1692 ~ 1770 イギリス)

は確立公式を導き出す。ターリッの考えから確立数学発展の時代でもあり、ここで誤差の考えを育む時代を迎える。18世紀は数学から統計学が分離独立し、推測統計学として発達してきた時代でもある。

ヨーロッパにおける18世紀の社会の趨勢は、フランス革命に代表される革命として、自然科学、とりわけ数学の分野にも革命の意識が芽生えて発展したと考えられている。幾何学分野においても、幾何学革命と称して、非ユークリッド幾何学に見られる新しい理論の構築がなされた。解析学にも解析学革命として、ダラバール(D'Alembert, Jean, Le Rond, 1717 ~ 1783 フランス)は17世紀から研究されてきた常微分方程式に対して、弦の振動問題から二次の偏微分方程式を導いた(1747)。この人は、高次常微分方程式の解法、複素関数の表現等でも研究成果を上げている。これにより解析学の分野が大きく前進する時代となる。解析学や代数学に代表される数学理論の普及はやがて計算への実証を試みる時代へと橋渡しされて行く。

この時期、数学はやがて自然史と共存し、地球の年代予測(当時の地球誕生推定、75,000年前)の数理的研究へと発展して行く。数学としての教科書が多く作られて、一般市民にも研究された数学の先端情報が、普及して行く時代でもあった。

18世紀後半になると産業革命の活性化があり、ここで応用数学の芽生えが出来、工学への適用が試みられた時代である。数値解法の具体化研究が始まる時代でもある。この時期 テーラー(Taylor, Brook, 1685 ~ 1731 イギリス)は、ポアッチ数学の研究から無限級数を、テーラー展開としての方式を提案する。この考え方は今日の差分の理論に取り入れられている。これがテーラー級数として普及した。このテーラーを手本にマクローリン(Maclaurin, Colin, 1698 ~ 1746 イギリス)は、マクローリン級数を考案した。そしてマクローリン級数を始め級数の展開とその実用性が目指された。一方 オイラーの微分方程式の定義とその解法、ダラバールによる常微分方程式の解法等が上げられる。これらは手回し機械を回転させた計算方法で、収束値を求めて行く事が出来た。クラム(Cramer, Gabriel 1704 ~ 1752 フランス)は方程式から 3×3 行列を定義し、斜め位置に有る係数を掛け合わせることで、方程式が解けることを証明した(1750)。

これと平行して研究していた解析数学者 ヲグランジュは、ヲグランジュ関数を構成させて提案すると共に解析学的分野から力学研究を進めた。先人ヲイブニッツが考案した「行列式の原案の考察」(1690)の行列式を研究した上で、複数の数式を1つに纏めて定義した今日の行列式の原案とも言える「行列式の表現」(1773)を発表した。数学と力学の境界点としての旺盛な研究意欲から、工学分野への名作、解析学的力学(1788)を後世に残した。この時期から工学分野を的にした行列としての数値計算の幕開けである。

その他、この時代の著名な数学数値計算での活躍者は、レオナルド・オイラー (Euler, Leonhard, 1707 ~ 1783 スイス) 解析学と微分方程式、オイラーの方程式 微分方程式(オイラー法)がある。

計算機発達の点からはジャーカルの機械計算機(1799)等が開発される。

19世紀以降

6) (1801 ~ 1850) 19世紀前半

19世紀に入ると、解析を基礎とした上で理論数学が発達した時代であり、工学分野では応用数学が一層発達する時代を迎える。機械計算機の研究が行われ、新たな数値解法が提案され、試みられる時代でもある。これに伴い工学ニーズが高揚して行く。19世紀初めにおいては、この時代は物理学への発達も著しく、経験主義による力学に基礎を置くのもで、現在では古典物理に位置づけされる分野であるが、この物理を解析的に数値解を求めようと工夫した時代である。それは古典数学としての強存在(解析的思考)としての数値計算の確立であった。この時代コーシーは、ヲグランジュ数学を研究し、そこから行列式(1812)を定義した。今日一般化されている行列式の始まりである。コーシーは更に解析学を力学から自立させ「複素変数の関数解析」(1831)を提案した。

コーシーの行列式(小行列分解)に対して、ガウスは数値計算としてより効率的な解法 ガウスの消去法を考案した(1823)。このガウスの消去法に代表される直接法としての解法は、この流れを引いていると考えられる。行列を適切に操作しても、行列式そのものの値は不変である性質に着目し、行列の各値を消去する考えが出来る。すでに計算機が実用化に向けての準備の時代となったが、初期の計算機として、処理速度は現在に比べて著しく遅かった頃であり、その処理速度から対象とした問題が密で小規模な行列を正確に求める事にのみに着眼があった。又一方で旧来の数学的発展は続き、無限小による収束や一様収束の考えが反復を生み出した。その頃幾つかの問題(古典物理)を検討して行く過程で、そのモデルの持つ性質から、もとの性質が崩れない反復的な考えとして取り入れられる様になった。反復法の代表であるヤコビ(Jacobi)法(1804 ~ 1851, ドイツ)、その後ザイデル(Seidel, P.L.V., 1821 ~ 1896, ドイツ)は、数学の一様収束の概念を組み立てて、その改良であるガウス-ザイデル(Gauss-Seidel)法にみる反復法を提案した。

確率論的物理学者ラプラス(Laplace, Marguis, 1749 ~ 1827 フランス)は、ニュートン数学を物理上から研究するうち、ある種の方程式を構築させてラプラス方程式として提案した(1805)。

少し後に数理物理学者ポアソン(Poisson, Simeon-Denis, 1781 ~ 1842 フランス)は、ラプラス方程式を研究するうち、

定数項を加味したポアソソ方程式を考案する(1820)。これは今日の計算物理学の基本式となっている。テラー級数の研究からフーリエ(Fourier, Jean, 1768 ~ 1830 フランス)は工学研究分野への計算を無限展開の理論としてフーリエ級数、フーリエ変換を提唱した(1807)。この考えは、その後の工学研究への躍動になった。

フーリエの理論研究から進めて、フーリエの研究も行ったディリクレ(Dirichlet, P.G. Lejeune 1805 ~ 1872 ドイツ)は、収束のための十分条件やフーリエ級数に対する十分条件を与えてディリクレ条件として提唱した。物理学への境界値問題としてのディリクレ条件である(1850)。一方理論数学者アベル(Abel, Niels Henrik, 1802 ~ 1829 ノルウェー)、ガロワ(Galois, Evaliste, 1811 ~ 1832 フランス)等の活躍がある。

その他著名なものに、この時代2進数代数学の論理を提案した数学者ブール(Boole, George, 1815 ~ 1864 アイルランド)の研究は、その後の20世紀の電気回路の基礎理論、電子計算機の内部表現であるビットの考え方を理論的に確立(1850)させた。計算機ではバベージの階差計算機等研究されている。数値解の面からは回転式機械計算機で解を検証した時代である。

7) (1851 ~ 1900) 19世紀後半

19世紀後半になると、それまでは数学が解析学を基礎とした理論手段に対して、自然数が大事と再認識され、そこで扱う領域が自然数の離散集合として研究が進んで行く。これらは群論に見られる形への基礎を作り、この離散的側面と連続的側面を絡ませる方向へと向かって行く。方程式では実解析のニーズが生じてくる。一般的に有理数や無理数は扱いにくく、解近似解で置換する考えの発展である。このニーズはやがて解析学の算術化として発展し、計算機発展へ加速する方向へ向かう。

一方、数学は特殊な数の類、及び非代数学的実数からなりうるリウヴィル数として超越数が発展して行く。こうした考えから、エルミート(Hermite, Charles 1822 ~ 1901 フランス)は、超越関数の定義と独自のエルミート行列を定義する(1873)。

新しい数学者として、リ- (Lie, 1842 ~ 1899 フランス)、リ-マン(Riemann, Bernhard, 1826 ~ 1866 ドイツ)、カントル(Cantor, Gong, 1845 ~ 1918 ドイツ)、ポアソカ(Poincare, Jules Henri, 1854 ~ 1912 フランス)、ヒルバ-ルト(Hilbert, David, 1862 ~ 1943 ドイツ)等理論数学研究者が輩出し、数学分野は一定の方向性を目指して発展して行く。それまでの解析数学から位相数学等に代表される空間論数学や集合論への飛躍である。工学に於ける数学への応用研究とは少しずつ方向性が変化して行く時代になる。数学は代数学、幾何学、解析学、関数論等に専門分野毎に分かれて研究が進められる。

応用数学の立場から考えると、物理面を考慮した従来の古典数学から実用化を目指した応用数学への発展が期待出来た時代である。数式の具体的解法を目指した方法である。合わせて数学の発展は、集合の理論や最小自乗法の考えにも発展して行く。ジョルダン(Jordan)は数学の応用として、行列を有界部分集合に見立ててある条件を満たす測度を対応させる考えから、ガウスの消去法を改良してガウス-ジョルダン(Gauss-Jordan)法を提案した(1868)。この解法は今日掃き出し法として各方面に活用されている。この解法は1990年代の並列解法を目指す次世代数値解法の基礎研究材料にもなっている。

測量士コレスキ- (Cholesky)は、最小自乗法の考えから下三角行列と上三角行列(下三角行列の転置行列)に分解する事により、効率良く解ける事を提案した(1870)。こうした考えは、その後計算機の発達と共に自然科学の分野で対象とした行列が汎用化されるにつれて、適用が広がる様になってきた。このコレスキ-分解の考えは、今日不完全コレスキ-分解として大規模疎行列の先駆的研究テーマになっている。現在の行列の前処理法の計算理論にも大きな期待が寄せられている。

19世紀の後半は、あわせて抽象数学発展の基礎を築き、方程式論に抽象概念を組み入れて、新しい数学概念を構築した時代でもあった。一方で、解析を基礎とした上で、現代数学に繋がる理論数学も発達した時代であり、工学分野では応用数学が一層発達する時代を迎える。

この時期には機械計算機の研究が盛んに行われ、新たな数値解法が提案され試みられる時代でもある。これに伴い工学ニーズが一層高揚して行く。

それらに呼応した計算機は、解析機関として活用する事が実証し始めた頃である。計算機も現実的になってくる。著名な計算機としてシュウツの階差機械計算機、ケルヴィン計算機、ホリレス計算機、マイケルソン-ストラットン調和解析機他が開発された。

8) (1901 ~ 1945) 20世紀前半 (戦前)

20世紀に入ると、ハウスドルフ(Hausdorff, Felix, 1868 ~ 1942 ドイツ)、レベグ- (Lebesgue, Henri, Leon, 1875 ~ 1941 フランス)、バナハ(Banach, Stefan, 1892 ~ 1945 ポーランド)等高等理論数学者が台頭し、やがて数学分野は空間数学への追究を進め、更に測度論への探求等、工学分野の数学とは1線を画す時代となる。数学理論は数値計算とは別分野になり、理論展開を重要視する方向へ向かう。数学分野では19世紀の専門数学分野の上に更に関数解析、位相数学、群論等が新規に加わり、その研究範囲が広がって行く。数値計算は解析理論を含めながら数値解析とも呼ばれる様になり、計算機の発達と共に独立した分野へ育って行く様になる。

一方、第二次大戦中は軍事研究の基で、数学的分野からOR(オペレーションズリサーチ)の新分野が確立される。応用数学の立場からは、物理を中心とした自然科学だけではなく、多くの問題(理工学事象)が研究される時代になる。

物理学研究を中心としたアインシュタイン(Einstein, Albert, 1879~1955 アムリカ)による一般相対性理論(1915)の提唱は、式は立てられたが解法に手間取った19世紀の計算方法の改良に拍車をかけるようになる。常微分方程式の場合も収束方法が研究され、偏微分方程式等で近似された差分式の解法もいろいろ工夫された。

自然科学での式は行列計算を含めて、20世紀に入ってから数式の特徴を活かす為、ある程度の大きさ(小規模)の行列を探究する機運が出来る。行列の解法として、適切な行列の分解(LU)にも応用されるようになって行く。クラウト(Crout)が研究した解法はLU分解法(1941)として大きな発展をもたらした。このLU分解法は、今日不完全LU分解法として発展を続けて、反復行列に対する行列の前処理法として1つの系を作り、大規模な行列計算の高速数値解法に大きな進歩をもたらした。

この時代 計算機も大きく進歩し、電気計算機として微分解析機等の名で研究に用いられたり、一方で電動モーターと機械仕掛けのアナログ計算機として発展するようになった(Bush計算機、1925)。MITでは微分解析を行う手段として、MIT微分解析機が開発された(1935)。ハーバード大学では計数型計算機として、この時代としては群を抜き、格段に優れた高速電気計算機 MARK が開発された(1944)。これらの電気計算機にて常微分方程式の収束方法が研究された。常微分方程式は追跡方程式として、今日ロケットや弾道ミサイルの軌道予測計算となっている。つまりこれは数値計算がロケット研究に活用された始まりである。この時期は常微分方程式の数値解法として、オイラー法としての計算が中心であった。

9) (1946 ~ 1959) 20世紀後半 戦後~1950年代迄

1950年代までに於いては、数学者集団ブルバキ(Bourbaki, Nicolas, 1930~ フランス)、コーエン(Cohen, P.J., 1930~ フランス)、デルサール(J. Delsarte, 1903~1968 フランス)等高等理論数学者は、より高度な数式を目指すようになる。これは現代数学としての勃興である。数学は仮定をたてて式を展開する空間数学として研究され、それはやがて抽象数学への方向性を目指して進んで行く。戦前から研究されてきた数学としての代数学、幾何学他は、例えば幾何学をとり上げれば平面幾何学、立体幾何学、微分幾何学、射影幾何学、位相幾何学、リーマン幾何学等の如く更に細分化されて発達して行く。そして数学から分離した統計学は確率論を含めて、独立した1つの

学問分野として育って行く。

これ以降は数値計算を主とした応用数学と計算機の関わりから論じたい。それ迄の機械を中心とした計算機に比べて、真空管を素子とする計算機が開発される。これは電子計算機の名で登場し、少ないながらも記憶容量の機能を有する計算機の時代になる。この時代になると、行列(中小規模)を変形したり分離したりする考えが出されたり、少しでも高速で解を求めようと加速パラメータ等を入れて収束へ導く方式が考え出される。

つまり加速パラメータに加速パラメータを加味し漸近収束率を高め、高速収束を目指したSOR法をYoungとFrankelは提唱した(1950)。SOR法系はこの時期以来、工学や基礎論を追求する計算物理の分野に多く適用されるようになった。

同じ加速パラメータでも反復法の長所である高速解法の中に、直接法の長所である厳密解法の組み込み研究を行い、行方向求解、列方向求解による交互方向の解法をPeacemanとRachfordが提案した(1955)。これはADI法と呼ばれ、今日原子力や核融合分野に良く使われている。

一方で20世紀に入ってから現代数学の発展と共に、応用数学分野へ空間論の考えが構築され、その空間内で解への最急方向を見出す解法が考えられてくる。

HestenesとStiefelは一次独立なベクトルを定義し、空間内を直交性を保って探索する考え方として共役勾配法(CG法)を提唱した(1952)。この解法は、その後各種の前処理(Preconditioning)を施す事で計算の効率化を目指したCG法系として発展し、幾つもの種類が研究されるようになった。この頃は、対象とする問題(物理学への解析他)も発展してきた時期である。モデルを注視する考えから行列そのものに着目し、行列を分解したりして基の性質を保存したり、対称、非対称の考えが取り入れられたり、対角行列の効率化の考えが芽生えたりした時期と考えられる。又、一部に固有値問題解法に関する考え方が出てくる。

原子力物理学者オッペンハイマー(Oppenheimer, John Robert, 1904~1967 アムリカ)の偏微分方程式の数値解法要求に影響を受けた応用数学者ライマン(Von Neumann, John, 1903~1957 アムリカ)は物理問題におけるライマン条件を定義する傍ら、ペンシルバニア大学において真空管による(ライマン型)計数型電子計算機ENIACの開発に成功した(1946)。この時以降、計算機は電子計算機の時代となる。人類初の人工衛星スピートーク1号が宇宙に飛び出した時代である。NASAではジェミニ計画が実行される。常微分方程式の収束方法として、この時代はルンゲクッタ法(1次)が用いられるようになる。

1 0) (1960 ~ 1969) 1960年代

1960年代に於いては、それ迄の計算機に比べて、処理速度も向上し、記憶容量も拡大する頃になると、コンピュータの名で普及し始める時代になる。このころから様々な理工学事象が研究される時代を迎える。それ迄理論上の構成物であった直交行列、ユニタリ行列、エルミート行列等の応用的展開としての解法が様々考え出される時代になる。対象とするモデルの解析では、固有値が必要とされる要求が出てくる。その固有値解法としてのパワー法、ギブンス法、ハウスホルダー法、エバーライン法、QR法、その他である。更に、代数学的な論理から展開された多項式的な考えも出されてくる。又、構造物に節点を定義するモデルが帯行列になっている事から、正確性を求めて来た直接法の解法にも高速性が要求されたり(最小次数順序法1969)、数値計算そのものに計算過程の収束性や安定性が要求された時代であった。微分方程式では陽解法の考えが主流を占めていた。行列に於いては行列変形(ハッセルベルグ変形)の考えが、工学分野に研究される時代になる。収束計算では漸近収束率の研究からスペクトル分解の効率が研究された。

一方、構造力学の分野からは有限要素法の考えが出される。この時代、宇宙開発計画としてマーキュリー計画からアポロ計画への時代である。アポロ計画による人類初の月面着陸では、当時CDC7600の高速コンピュータが用いられた。

数値解法の中心はSOR法であり、この解法はその後いろいろな分野に対する研究対象として改良され、枝葉としてSLOR法、SSOR法、Point Block SOR法、2-Line SOR法、Odd-Even SOR法他があり全体としてSOR法系を構成するようになった。

一方、原子力分野において固有値問題の高速計算の必要性から加速パラメータをいれたチェビシェフ加速法(準反計算)(1960)が提案され実用に効果を表した。この頃常微分方程式ではルンゲクッタ法(2次)が実用化されている。偏微分方程式の離散化は中心差分法(1次)で解くことが主流であった。

一般産業界におけるニーズによりOR、統計学、基礎数値計算、構造解析基礎分野がソフトウェアとして整備された時代である。

1 1) (1970 ~ 1979) 1970年代

1970年代になり、コンピュータの名のもとに広く普及し始めた時代になると、計算機はそれ迄に比べて処理速度も格段に速くなり、記憶容量大きくなると、大きな問題(モデル)が要求され自然現象を簡易モデルとして作り、各解法を適用したりする時代である。この頃では、モデルとしては疎行列の特徴に着目したり、規則、不規則行列の特徴を計算過程に取り組

もうとし、そのモデルに対する条件数の考え方が実用化される様になる。更に、理工学の進歩からある分野に特定して、メッシュ問題に対する効率的解法(MG法)等の考えが出されてくる。

この時代、筐体の大きな計算機に対する計算要求と数値計算の重要性が社会的に要求される時代となる。超高速の名のもとにスーパーコンピュータCRAY1(1976)が初めて社会に出た時代でもある。数値計算の高速化が脚光を浴びる時代となる。構造解析の整備を初め流体解析、電磁解解析、原子力核融合、宇宙科学等のソフトウェアも次代に整備され社会的に整備されてきた。スーパーコンピュータの登場に合わせて、プログラミングのベクトル化としての考え方が芽生える時代でもある。解法理論として、微分方程式では陽解法に替わって陰解法の考えが主流になり、安定解への研究探索が行われる。行列に於いては行列分離の考えが、応用される時代になり、行列分解の事例研究も多くなる。境界要素法としての考え方や、偏微分方程式の離散化方式に風上差分法や蛙飛び法、EVP法が提案される。構造解析の大型計算の発達と共に差分システムでは、バンド幅縮小法が実用化される。宇宙開発計画ではアポロ計画からヴァイキング計画の時代である。

流体力学ではナビア-ストークスの方程式を2次の中心差分法で解法を行ってきた。

超高層大型構造解析の幕開け時代となり、大規模行列のメモリ縮小を目指し、バンド幅縮小法等の解法が提案される。行列計算と解析上、同等の数値解が得られるFFT(高速フーリエ変換)が計算物理で実用化され評価が得られた時代である。また数値解法としてのソフトウェアが各種商用化され、普及し始めた時代である。

1 2) (1980 ~ 1989) 1980年代

1980年代に入ると、スーパーコンピュータが実用化の時代になり、超高速計算、大記憶容量が実現する時代になる。ますます大規模なモデルへの適用と自然現象のあらゆる分野への適用が可能になって来る。理工学事象で行列に現れるn点差分係数行列をうまく解かせる為、行列の不完全な分解や、対角行列因子分解、そして行列の前処理としての考えが発達し、スケールアップ効果が提案されたり、一方スーパーコンピュータの特長を活かす為、大規模行列の高速解法としてベクトル処理効率化としての考えが出される。

構造解析分野への差分システムでは、数学のグラフ理論を応用した、ブロック化法が提案される。回路解析の分野では三角化法(Markowitz, Tewarson)等が計算へ応用される。

行列問題では、行列分解から不完全分解への研究が盛んになり、そしてこの前処理法としての研究進展はその後、80年代後半になるとスケールアップ法により大型行列

の高速解法が実現される。直接法ではブロックス対称非対称の大型直接解法が提案される。

この時代、計算回数を減らす目的として、行と列の効率的順序付けによる「オーダリング」の考えが出来、直接法の高速化研究も盛んに行われた。

宇宙開発分野はやがて木星、土星を目指したヴァイキング計画の時代である。この時代スペースシャトル実用化の時代になる。流体力学から派生した離散化手段としてFTCS法や原子力問題から研究された粒子のコードから意識したMAC法、SMAC法、SOLA法、ICE法等が提案される。

理論物理(化学)、実験物理(化学)に加えて、新しい学問体系として第三の学問、計算物理(化学)が社会で重要な位置を占める様になる時代でもある。科学計算のソフトウェアも大きく進歩し、基本的計算を満たすソフトウェアを初めとして、スーパーコンピュータに適したベクトル化された高速アルゴリズムが社会に流通し始める時代になる。計算分野では分子生物学、分子動力学、生化学等分子科学分野や素粒子、天文学等に対してもソフトウェアの開発と普及が迎える時代である。数値解析分野では行列の対称非対称に分けた分野毎のソフトウェアが整備され普及して行く。

1 3) (1990 ~ 1999) 1990年代

1990年代には、半導体としての素子の限界が見えた時代になる。計算機の高速性を追求する上でスーパーコンピュータの並列化への考えが研究される時代となる。高並列化へを更に追求した実装化研究に加えて、一方で半導体ではない他の考え(バルク、量子、光子、原子)による新しい計算機の可能性の探索研究が活性化して行く時代である。現状の計算機と数値モデルに関して、より大きなモデルに対して並列処理を用いて高速に計算させる事が可能になる。対象がそれまでの工学や物理に止まらず生化学、生命科学、DNA、ヒゲルム、計算医学等への進歩が見られる。計算に必要なメモリの増大化の進歩に加えて、行列に於いてはより効率的な収束条件を追求する必要性から、空間数学理論としてのクリロフ部分空間解法等が研究され、安定的な高速解法の考えが実用化される。行列に於いてコーンが定義した行列以外に、最近ジェームズ(K.R.James、1950~アメリカ)は比較行列を定義し、行列の考えを広げる事が出来た。前処理としての考えもいろいろ出され、より大規模行列の数値解法を試みる時代となった。

一方素子の高速化追求は、他のコンピュータにも波及し、これまで過去の時代では高価で筐体が大規模なコンピュータが、20世紀後半に新しく登場した初期の時代のスーパーコンピュータ(CRAY1)が計算対象としていた計算量相当を処理速度の点で、90年代最後のパーソナルコンピュータ(最上位機種)で計算が可能になる時代となる。スーパーコンピュータの更なる高速

性と並列化実現方式により、物理等の分野では時間ステップの刻み幅をより細かく、つまりより大規模計算の要求が出てきて、これを可能にさせる様になった。一般の構造解析分野においては、パーソナルコンピュータで代用出来、産業界に普及して行く。計算理論では離散化手段としてTVD法等が提案される。

次世代型計算幾何学として、ナノサイエンス、ナノテクノロジーとしてのミクロにおける新しい分野が注目される様になった。ナノテクノロジーは、原子や分子を直接操作・制御することにより、基本的に新しい分子構造を持つ構造物を作り、その構造の新しい物理・化学・生物学的性質や現象や過程、それらの性質を利用し、新材料、デバイス・通信、バイオ・製薬、交通・宇宙航空、環境等の幅広い分野に大きな変革をもたらし、今後の科学技術の基盤として期待されている。新しいナノスケールの現象・過程を理解し工学的に役立てるためには、ナノ構造の電子的、光学的、機械的、磁氣的性質とそのサイズ、形、トポロジー、組み合わせの関係を追求して行くことが必要となっている。これらを実験や理論のみで理解することは極めて困難であり、計算科学シミュレーションの役割がますます重要となってくる。その計算科学シミュレーションは、これまで以上に大規模で、量子スケールからマクロスケールまでの多様な現象と分野を対象とするマルチスケール・マルチフェノメナ、マルチディシプリナリなものとなるため、新しいアルゴリズム、可視化、シミュレーション・システムの構築技術、並列処理、データベース、ネットワーク等を必要とし、量子情報科学が発達して、新しい視野に入れた計算科学のパラダイムシフトを引き起こす可能性を秘めています。そのようなナノサイエンス & テクノロジーにおける新しい計算科学シミュレーション基盤技術が成長させて来た。

宇宙開発分野は宇宙ステーション開発の時代を迎える。理論科学や実験科学だけではなく、これからは計算科学の名で、第三の科学としての数値シミュレーション時代の幕開けである。

1 4) (2000 ~ 2009) 2000年代

21世紀の数値シミュレーションとして2000年代に入ると、宇宙科学の分野からは、先進諸国は共同で宇宙ステーション建設の時代を迎える。ここで計算には時間及び空間を多量のメッシュが必要とされ、そして数値解法の特徴として、一般ディリクレ問題から更に変形ディリクレ問題へと発展して行き、これを計算精度良く解く問題は、時間発展の計算方法は2 Step Lax-Wendroff法により、空間微分に関しては中心差分法を用いて、また時間積分に関して

は、次数を上げて4次のRunge-Kutta-Gill法に基づいた形で、これらから大規模数値シミュレーションを実行する様になって来た。

一方で、次世代型計算幾何学として、ナノサイエンス、ナノテクノロジーとしてのミクロにおける新しい分野が注目される様になった。ナノテクノロジー分野は、原子や分子を直接操作・制御することにより、基本的に新しい分子構造を持つ構造物を作り、その構造の新しい物理・化学・生物学的性質や現象や過程、それらの性質を利用し、新材料、デバイス・通信、バイオ・製薬、交通・宇宙航空、環境等の幅広い分野に大きな変革をもたらし、今後の科学技術の基盤として期待されている。新しいナノスケールの現象・過程を理解し工学的に役立てるためには、ナノ構造の電子的、光学的、機械的、磁氣的性質とそのサイズ、形、トポロジー、組み合わせ関係の重要性の時代を迎える。

これらを従来からの実験や理論のみで理解することは極めて困難であり、計算科学シミュレーションの役割がますます重要となって来た。その計算科学シミュレーションは、これまで以上に大規模で、量子スケールからマクロスケールまでの多様な現象と分野を対象とするマルチスケール・マルチフェノメナ等を代表とする新しいアルゴリズムを必要とし、量子情報科学が発達して来た。このようなナノサイエンスにおける新しい計算科学シミュレーション基盤技術が成長して来た。

ナノサイエンスにおける応用領域の発達分野は、生体高分子系の数値シミュレーションとして、計算機による蛋白質の解明や、医薬品の理論的発明が可能となって来た。これは分子動力学シミュレーション (Molecular Dynamics Simulation) を基礎に持つ学問分野の発達である。これは具体的には原子における波動関数に基づく、第一原理手法を用いた電子状態の解析である。比較的少なめの原子数、現在では例えば1000原子×1000原子であっても、分子デバイスでの材料設計では理論的に天文学的計算を必要とし、今日では最高速計算機により1万原子程度の計算が可能となっている。現実的な原子の計算においては、最近のテラフロップスの1000倍にあたるペタフロップス級での高速化、更にその1000倍エクサフロップス級の高速化ニーズが求められ、大規模数値シミュレーションとしての道が開けてきた。

これからの時代、これまで基礎となる研究がされてきた原子から機械を作る理論的分野が、シンセシス(人工物創成)として、ミクロ技術の花開く時代を迎える。量子力学制御としてカーボンナノチューブに見る如く、

ナノテクノロジーとして数値シミュレーションと絡まって発展して行く。ナノテクノロジーの工学応用領域は2000年初期の次なる産業革命の旗手となる方向へ進むものと思われる。更に、ナノテクノロジーにおけるシンセシスは、これに学習機能を持たせることで、自己組織化人工物として発展を目指し、複雑適応系科学、創発科学、生命システム科学としてナノシンセシス数値シミュレーションが行われる方向へ向かうものと予想できる。

21世紀初頭においては、計算理論の面から技術方向を予想すると、数式の自己生成へと発展の芽生えが現れ始め、これは進化計算法として発展し、高速化計算の要求を絡めて一層開花して行くと考えられる。

そして計算機分野からは、いろいろな角度からの発展を遂げて行くと思定出来る。20世紀後半に大きく花開いた半導体のコンピュータとは別に、20世紀末から21世紀にかけて研究が続けられている超電伝導コンピュータが継続研究されており、そして半導体に替わって、今後は分子コンピュータや原子線ホログラフによる原子線コンピュータ、量子力学原理に基づいた量子コンピュータの研究、更に光を基礎技術とした光コンピュータ等の研究が今後の新しいコンピュータとして、技術が進んで行くものと考えられる。

これらを実験や理論のみで理解することは極めて困難であり、計算科学シミュレーションの役割がますます重要となってくる。その計算科学シミュレーションは、これまで以上に大規模で、量子スケールからマクロスケールまでの多様な現象と分野を対象とするマルチスケール・マルチフェノメナ、マルチディシプリナリなものとなるため、新しいアルゴリズム、可視化、シミュレーション・システムの構築技術、並列処理、データベース、ネットワーク等を必要とし、量子情報科学が発達して、新しい視野に入れた計算科学のパラダイムシフトを引き起こす可能性を秘めています。そのようなナノサイエンス & テクノロジーにおける新しい計算科学シミュレーション基盤技術が成長させて来た。

計算機による計算速度の面からは、これまで20世紀末にはギガフロップスの1000倍の高速計算機テラフロップスマシンが実現された。今後はこの速度が更に加速されて行くものと予想される。21世紀初頭にはテラフロップスの1000倍のペタフロップスの高速化時代が到来し、その後の予想として、21世紀の半ば迄にはペタフロップスの1000倍のエクサフロップスの高速計算機の実現、さらに21世紀後半頃には、エクサフロップスの1000倍となるゼタフロップスへの高速要求が必要とされる時代を迎え

る。22世紀にはゼタフロップスの更に1000倍となるヨタフロップスへの高速要求が必要とされる時代を迎えるものと考えられる。

参考文献

- [1] A.J.P.Taylor, English History, 1914-1945, Oxford History of England (1965), pp.171.
- [2] A.ア-ホン著, 中村幸四郎訳, 古代の数学, 河出書房, (1971).
- [3] 阿部邦美, 張紹良, 三井斌友, MRTR 法: CG 型の三項漸化式に基づく非対称行列のための反復解法, 日本応用数学会論文誌, VOL.7, No.1, (1997), pp.37-50.
- [4] A.F.エナ 鶴見和之, 新井理生共訳, 現代数学発達史, 東京電機大学出版局, (1990).
- [5] Axelsson, O., Solution of Linear Systems of Equations, Lecture Notes in Mathematics, 572, Springer-Verlag, (1977).
- [6] ホヤ-著, 加賀美鉄雄, 浦野由有共訳, 数学の歴史 (5分冊), 朝倉書店, (1985).
- [7] C.K. Birdsall and A.B. Langdon: Plasma Physics via Computer Simulation, McGraw-Hill, New York, (1985).
- [8] C.S.デサイ, J.F.ア-ベル著, 山本善之訳, マトリクス有限要素法, 科学技術出版社, (1982).
- [9] C.W.Hirt, B.D.Nichols, N.C.Romero, SOLA : A Numerical Solution Algorithm for Transient Fluid Flows, LA-5852, (1975).
- [10] D.E.Smith, A Source Book of Mathematic, vol.1 (1959), pp.156-164
- [11] D.J. ストリク, 数学の歴史, みすず書房, (1957).
- [12] Doi, S. and Harada, N., Tridiagonal Approximate Factorization Method : A Preconditioning Technique for Solving Nonsymmetric Liner Systems Suitable to Supercomputers, National Aero Space Laboratory , Special Paper 7, (1987).
- [13] F.Cajori, A History of Mathematics (New York, 1893), pp.138-139
- [14] F.シャトラン著, 伊里正夫, 伊里由美共訳, 行列の固有値, シュプリンガー・フェアラーク東京, (1993).
- [15] G.H.and Van Loan, C.F.: Matrix computations , Johns Hopkins, (1983).
- [16] Golub, Jennings, A. : Matrix Computation for Engineers and Scientists, John Wiley, (1977).
- [17] Kennedy, Isis, vol.43, p.50. D.J. de S Price, An Ancient Greek Computer , Scientific American, 200, (1959), pp.60-67.
- [18] H.Aiken, Proposed Automatic Calculating Machine edited and prefaced by A.G.Oettinger and T.C.Bartee, IEEE Spectrum, Aug. 1964, pp.62-69.
- [19] H. A. Van der Vorst, A vectorizable variant of some ICCG, SIAM J. Sci. Stat. Comp., Vol.3 (1982) pp.350-356.
- [20] ハ-マン H.ゴ-ルト ストイ著, 末包良太, 米口肇, 犬伏茂之共訳, 計算機の歴史, 共立出版, (1979).
- [21] 堀雅夫, 基礎高速炉工学, 基礎高速炉工学編集委員会, 日刊工業新聞社, (1993), 19-28.
- [22] I. Gustafsson : BIT, 18, (1978), pp.142-156.
- [23] 石森富太郎, 原子炉工学講座 3, 原子炉物理, 培風館, (1982).
- [24] 磯田和男, 大野豊, FORTRAN による数値計算のドブック, オム社, (1982).
- [25] 伊東俊太郎他, 科学史技術史事典, 弘文堂, (1994).
- [26] Joseph Needham Science and Civilisation in China, vol.3 (Cambridge, 1959), p.155
- [27] J. A. Mejerink and van der Vorst, Math. Comp. 31, (1977). pp.148-162.
- [28] J.シ-ドネ著, 上野健爾訳, 数学史, 岩波書店, (1985).
- [29] 笠原乾吉, 杉浦光夫, 20 世紀の数学, 日本評論社, (1991).
- [30] Kelvin , Mathematical and Physical Papers , vol , Cambridge 1911.
- [31] 近藤洋逸, 数学の歴史, 毎日新聞社, (1970).
- [32] 三田博雄, 古代数学史, 日本科学社, 1948.
- [33] Mabeth Moseley, Irascible Genius, A Life of Charles Babbage, Inventor London, 1964
- [34] M. R. Hestenes , E .Stiefel , Methods of conjugate gradients for solving linear systems , J. Res. Nat. Bur. Standard vol. 49, (1952), 33-53.
- [35] 村田健郎, 前処理付き共役勾配法・共役残差法, 情報処理, Vol.27, No5, (1986), 498-507.
- [36] 村田健郎, 小国力, 唐木幸比古, ス-パ-コ-ピ-ユ-タ, 丸善, (1985), 136 - 138, 152 - 153.
- [37] 村田健郎, 小国力, 三好俊郎, 小柳義夫, 工学における数値シミュレーション, 丸善, (1988).
- [38] 村田健郎, 名取亮, 唐木幸比古, 大型数値シミュレーション, 岩波書店, (1990).

- [39] 日本物理学会, スーパーコンピュータ, 倍風館,(1985).
- [40] 小倉金之助, 数学史研究, 岩波書店,(1970).
- [41] 名取亮, 野寺隆, 大規模行列における反復解法, 情報処理, Vol.28, No.11, (1987), 1452-1459.
- [42] Obert P Porter, The Eleventh Census Proceeding of the American Statistical Association No15 1891 p.321
- [43] Sekiya and Sakai, (OSAKA UNIV.), A Fast Computing Technique for Diffusion-type Equations, Journal of Computational Physics, Vol.65, No.2, August, (1986).
- [44] 島崎眞昭, スーパーコンピュータとプログラミング, 共立出版,(1989).
- [45] S.Lilley, Machinery in Mathematics A History Survey of Calculating Machines, Discovery vol.6(1945), pp150-182.
- [46] SOTANI, K. 「A Fast Numerical Solution of Neutron Diffusion Equation」 SNA'90
「The First International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications」 Japan Atomic Energy Research Institute, (1990).314-319.
- [47] 曾谷勝義, 数値解法の評価, 関西数計算研究会資料,(1991).
- [48] 曾谷勝義, 高速化技術における数値解法の評価, 日本統計学会論文,(1991).
- [49] 曾谷勝義, 効率的前処理による反復法 計算物理への適用例, 数値計算研究会論文,(1995).
- [50] 曾谷勝義, 計算物理における反復解法の評価, 日本応用数理学会平成6年度年会予稿集, (1994).
- [51] 曾谷勝義, 三項対角近似因子分解パラメータ, 日本応用数理学会平成7年度年会予稿集, (1995).
- [52] 曾谷勝義, 直接法反復法, 数値計算研究会論文,(1996).
- [53] 曾谷勝義, 三項対角近似因子分解パラメータを用いた中性子拡散方程式の高速数値解法,
<http://www.sv.cc.yamaguchi-u.ac.jp/~informat/>, 国際学術論文誌日中合同「情報」(1999).
- [54] 曾谷勝義, 計算物理による高速数値シミュレーション, 第19回シミュレーションテクノロジーコンファレンス, 日本シミュレーション学会シンポジウム, (2000).
- [55] R.C.Archibald, Seventeenth Century Calculating Machines Mathematical Tables and Other Aids to Computation, vol.1(1943), pp.27-28.
- [56] Richard Barrett / Michael Berry 著 長谷川里美、長谷川秀彦、藤野清次訳, 反復法, Templates, 朝倉書店,(1996).
- [57] ハトリツカ・ロチエ、高橋亮一訳, コンピュータによる流体力学(上、下), 構造計画研,(1984).
- [58] R.D. Richtmyer, K.W. Morton, Difference Methods for Initial-value Problems, Interscience Pub.,(1967).
- [59] R.Moulton, An Introduction to Celestial Mechanics 1931 pp.191-260.
- [60] R.S.Varga 著, 渋谷政昭訳, 計算機による大型行列の反復解法, サイエンス社,(1978).
- [61] 戸川隼人, マトリックスの数値計算, オーム社,(1986).
- [62] 後保範, ベクトル計算機向き ICCG 法, 京都大学数理解析研究所講究録, No.514,(1988).
- [63] Von Neumann, Collected Works, vol. , (1954), pp664.
- [64] Von Neumann and B. Tuckermann, Continued Fraction Expansion of 2 vol.9(1955), pp.23-24.
- [65] V. Veri, W.J. Karplus, Digital Computer Treatment of Partial-Differential Equation, Prentice-Hall, (1981).
- [66] 渡部力, 名取亮, 小国力, Fortran77 による数値計算ソフトウェア, 丸善,(1990).
- [67] Yasuo Tokunaga, Hiroo Harada and Misako Isiguro, Vectorization of Nuclear Codes and Numerical Methods, Computing Center, Tokai Research Establishment, JAERI, M, (1988).